中国生态农业学报 2017 年 6 月 第 25 卷 第 6 期
Chinese Journal of Eco-Agriculture, Jun. 2017, 25(6): 876−883

DOI: 10.13930/j.cnki.cjea.160967

朱中华, 韩拓, 柳金权, 朱高峰. 基于贝叶斯方法的光合作用生化模型参数估计及其在干旱区葡萄上的应用[J]. 中国生态农业学报, 2017, 25(6): 876−883
Zhu Z H, Han T, Liu J Q, Zhu G F. Biochemically-based model for photosynthetic parameter estimation using Bayesian method and its application in grapes in arid region[J]. Chinese Journal of Eco-Agriculture, 2017, 25(6): 876−883

基于贝叶斯方法的光合作用生化模型参数估计及其在干旱区葡萄上的应用*

朱中华[1], 韩 拓[2**], 柳金权[3], 朱高峰[2]

(1. 甘肃省水利水电学校 兰州 730021; 2. 兰州大学资源环境学院/西部环境教育部重点实验室 兰州 730000; 3. 华亭县水务局 华亭 744100)

摘 要: 以无核白葡萄为试材, 测定了其在不同季节(6—9 月)、不同胞间 CO_2 浓度下的净光合速率, 根据贝叶斯方法, 结合蒙特卡罗马尔科夫链算法对光合生化模型参数进行估算, 以期获得不同季节的模型参数值, 并与最小二乘法所得结果对比, 探讨贝叶斯方法在解决高维度复杂模型参数估计问题中的可行性和葡萄光合作用关键参数季节变化规律。结果表明, 最大羧化速率(V_{cmax})、最大电子传递速率(J_{max})、磷酸丙糖利用速率(TPU)均有明显的季节变化特性, 出现先增后减的趋势, 8 月达最高, 分别为 54.30 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$、88.45 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ 和 6.56 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$; 9 月最小, 分别为 34.66 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$、58.86 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ 和 4.38 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$。叶肉导度($g_m$)在各个月份波动不大, 6—9 月分别为 5.16 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1}$、5.29 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1}$、5.39 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1}$ 和 5.41 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1}$。与传统的最小二乘法相比, 贝叶斯方法估算的 V_{cmax} 值偏小, J_{max}、TPU 和 g_m 无明显差异。同时贝叶斯方法估计出的模型参数是在考虑参数先验信息的基础上获得的, 生化意义更加显著。试验表明, 光合作用生化模型(FvCB 模型)在应用于光合作用模拟时, 应充分考虑其参数的季节变化性; 结合蒙特卡罗马尔科夫链算法的贝叶斯参数估计能更有效解决 FvCB 模型中参数估计问题。

关键词: 干旱区; 葡萄; 贝叶斯参数估计; 光合作用生化模型; 光合作用参数; 季节变化
中图分类号: Q945.79 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-3990(2017)06-0876-08

Biochemically-based model for photosynthetic parameter estimation using Bayesian method and its application in grapes in arid region*

ZHU Zhonghua[1], HAN Tuo[2**], LIU Jinquan[3], ZHU Gaofeng[2]

(1. Gansu Provincial Water Conservancy and Hydropower School, Lanzhou 730021, China; 2. College of Earth and Environmental Sciences, Lanzhou University / Key Laboratory of Environmental Systems of Western China of Ministry of Education, Lanzhou 730000, China; 3. Huating County Water Authority, Huating 744100, China)

Abstract: The response of photosynthesis to CO_2 concentration can provide a number of important parameters related to environmental factors. Using white seedless grape as the tested material in this study, net photosynthetic rates of leaves were measured for different intercellular CO_2 concentrations during two typical growing seasons from June to September in 2014

* 国家自然科学基金(41571016)和中央高校基本科研业务费(861944)资助
** 通讯作者: 韩拓, 主要从事生态水文方面的研究。E-mail: hant14@lzu.edu.cn
朱中华, 主要研究方向为水利水电和生态水文。E-mail: hant16@lzu.edu.cn
收稿日期: 2016-10-29 接受日期: 2017-03-01
* This study was supported by the National Natural Science Foundation of China (41571016) and the National Higher-education Institution General Research and Development Project of China (861944).
** Corresponding author, E-mail: hant14@lzu.edu.cn
Received Oct. 29, 2016; accepted Mar. 1, 2017

and 2015. A widely used biochemical model (FvCB model) in the simulation of CO_2 and H_2O gas exchange at the leaf scale was parameterized using data obtained from situ leaf-scale observations. In order to obtain the photosynthetic parameters values, to explore seasonal variations in the photosynthetic parameters in different seasons and to discuss the feasibility and advantage of the Bayesian method in solving high dimensional and complex model parameters estimation, the Bayesian approach was used to estimate the parameters of the FvCB model. In order to generate the Bayesian posterior probability distribution, a version of the Markov Chain Monte Carlo (MCMC) technique was used. In contrast, the least square procedure was used in the application of the same set of observational data. The results showed that maximum ribulose 1.5-bisphosphate carboxylase/oxygenase (Rubisco) carboxylation rate (V_{cmax}), potential light-saturated electron transport rate (J_{max}) and the rate of use of triose-phosphates utilization (TPU) had evident seasonal variations which increased from June to August, and then decreased in September. The maximum values were observed in August (54.30 μmol·m^{-2}·s^{-1}, 88.45 μmol·m^{-2}·s^{-1} and 6.56 μmol·m^{-2}·s^{-1}, respectively) and minimum values in September (34.66 μmol·m^{-2}·s^{-1}, 58.86 μmol·m^{-2}·s^{-1} and 4.38 μmol·m^{-2}·s^{-1}, respectively). The trend in mesophyll conductance (g_m) was relatively stable in different months, with respective values of 5.16 μmol·m^{-2}·s^{-1}·Pa^{-1}, 5.29 μmol·m^{-2}·s^{-1}·Pa^{-1}, 5.39 μmol·m^{-2}·s^{-1}·Pa^{-1}, 5.41 μmol·m^{-2}·s^{-1}·Pa^{-1} from June to September. In comparison with traditional least square method, the values of V_{cmax} estimated by the Bayesian method were relatively small and those of J_{max}, TPU and g_m had no obvious difference. Also because the estimated parameters by the Bayesian method were obtained after adequate consideration of prior information, each parameter was in biological sense obviously more meaning. As a consequence, it indicated that the Bayesian approach combined with Markov Chains and Monte Carlo (MCMC) sampling algorithm was an effective way of estimation of the parameters in the FvCB model. As the parameters in the FvCB model were different in different seasons, it was necessary to consider these variations in using the parameters in the FvCB model.

Keywords: Arid region; Grape; Bayesian parameter estimation; Biochemical photosynthesis model; Photosynthetic parameter; Seasonal variation

近年来，光合作用的模型研究得到人们日益关注[1-2]。其中，von Caemmerer 等[3-6]的光合作用机理模型(以下简称 FvCB 模型)因具有明确生物学意义而被广泛应用于光合作用研究中，并被多数碳循环模型(如 SiB、CLM 等)所采用。在该模型中，最大羧化速率(V_{cmax})、最大电子传递速率(J_{max})、磷酸丙糖利用速率(TPU)是表征植物光合能力的关键参数。如何利用实测净光合速率/胞间 CO_2 浓度变化曲线(A/C_i 曲线)估计这些参数不仅是植物生态学研究的热点，也是提高陆地碳循环模拟精度的关键[7]。

前人以不同植物为研究对象对模型参数估计做了较多研究。Harley[8]等和 Wullschleger[9]用分段估计法对棉花(*Gossypium* spp.)和 109 种 C_3 植物的 V_{cmax}、暗呼吸速率 R_d 和叶肉导度 g_m 进行了估计，但此类方法以胞间 CO_2 浓度分压等于 20 Pa 为节点进行数据的经验性分割，不但受人为因素扰动较大，而且当数据集较小时收敛较为困难；Dubois 等[10]和 Miao 等[11]结合格点搜索利用非线性最小二乘法同时估计出 V_{cmax}、J_{max}、TPU 和 R_d，但该方法是以求误差的最小值来逼近参数真值，较适用于连续性函数的参数估计，而对于分段不连续且高维的 FvCB 模型难以获得全局最优结果；Su 等[12]将遗传算法应用到 FvCB 模型主要参数的估计当中，克服了传统迭代方法容易陷入局部最优解的缺陷，但该算法后期适应度容易趋向一致，使优秀的个体在产生后代时优势不明显，导致算法进化后期搜索效率较低；近年来，Zhu 等[13]和 Feng 等[14]先后将贝叶斯方法应用到光合作用模型参数估计当中，较其他方法有明显的优势。与其他参数估计方法相比，贝叶斯方法在充分考虑观测误差和模型结构误差的基础上，获得参数的分布范围，大大提高了拟合精度。然而将该方法应用于光合作用生化模型参数估计，获取适用于我国西北干旱区葡萄的模型参数的研究尚鲜见报道。

本文以我国西北干旱绿洲典型农田生态系统经济作物葡萄(*Vitis vinifera*)为研究对象，利用便携式光合作用-荧光测量系统获取不同季节葡萄净光合速率随胞间 CO_2 浓度变化的数据。在此基础上，应用贝叶斯方法对 FvCB 模型参数进行估计，并分析其与叶片特性的关系，以验证贝叶斯方法在解决高维度复杂模型参数估计问题的可行性，并估计出模型参数和具有的生化意义，揭示葡萄光合作用关键参数季节变化规律及其与叶片特性的关系，增进对干旱绿洲典型经济作物葡萄光合特征的认识，为提高农田生态系统的产量提供科学指导，推动贝叶斯方法在植被光合作用模型参数估计研究上的应用。

1　研究区概况

试验地位于甘肃省敦煌市阳关镇南湖绿洲西南部，距市区约 70 km，东、南、北三面环山(三危山、

祁连山、北塞山)，西接塔克拉玛干沙漠，观测点地理坐标为 39°53′N, 94°07′E，海拔 1 100~1 297 m；深居内陆，属暖温带干旱性气候，日照时间长，昼夜温差大，降水稀少，蒸发量大，年均降水量 36.9 mm，年均潜在蒸发量达 2 486 mm[15]。年日照时数为 3 115~3 247 h，年均气温 9.3 ℃；土壤主要为隐域性土壤，包括沼泽土、草甸土和盐渍土等。观测点位于南湖绿洲西南部，属农田生态系统，土壤类型为绿洲灌耕土，葡萄园每月下旬进行一次人工大水漫灌，确保植物在充分供水条件下生长。

2 材料与方法

2.1 试验材料

试验材料为'无核白葡萄'(Thompson Seedless)，平均冠层高度 1.84 m，平均胸径 3.2 cm，树龄 13 a。随机选取 4 棵植株，利用便携式光合作用-荧光测量系统(GFS-3000)进行 CO_2 响应曲线(A/C_i)测定。观测日期分别为 2014 年的 6 月、7 月、8 月、9 月，涵盖了葡萄的开花期、坐果期、浆果生长期、浆果成熟期 4 个典型生长期。观测时间处于每月中下旬某一晴天的 10:00—16:00。观测叶片则选取位于冠层中上部的成熟阳生叶片，用于不同季节自然条件下的活体测定，每株选 3 片叶子进行重复试验。

测量前，使叶片处在饱和光照条件下(PAR_{top}=1 200 mol·m^{-2}·s^{-1})适应 30 min，此时酶活性被完全激活。6、7、8、9 月叶室温度(T_{cuv})分别设置为 25 ℃、30 ℃、30 ℃和 20 ℃，保证了与当月自然环境温度的一致性。环境大气压强(P_{amb})为 86 kPa，叶片温度(T_{leaf})设定范围为 24~34 ℃，样品室相对湿度(RH)控制在 40%~65%，均处在当月光合作用的最佳范围内，气流速率为 750 μmol·s^{-1}，保证了 CO_2 的充分吸收。在以上设置不变的情况下，调整 CO_2 绝对浓度(CO_{2abs})来完成不同植株、不同叶片在不同季节的 A/C_i 曲线测定。CO_{2abs} 最初设为 120 kPa，而后为 100 kPa、80 kPa、60 kPa、50 kPa、40 kPa、30 kPa、20 kPa、10 kPa 和 5 kPa 共 10 个水平，在每个 CO_2 浓度下适应 2~3 min 后开始测定，且每个梯度记录 3 次，求均值。

2.2 模型简介

FvCB 模型将整个光合作用过程划分为 3 个限制阶段：二磷酸核酮糖羧化酶限制阶段(Rubisco 限制)、二磷酸核酮糖再生限制阶段(RuBP 限制)和磷酸丙糖利用限制阶段(TPU 限制)，其表达式为[3-5]:

$$A_n=\min\{A_c, A_j, A_p\} \tag{1}$$

$$A_c=V_{cmax}\times(C_c-f^*)/[C_c+K_c\times(1+o/K_o)]-R_d \tag{2}$$

$$A_j=J\times(C_c-f^*)/(4C_c+8f^*)-R_d \tag{3}$$

$$A_p=3TPU-R_d \tag{4}$$

$$\theta\times J^2-(a\times Q+J_{max})J+a\times Q\times J_{max}=0 \tag{5}$$

$$C_c=C_i-A/g_m \tag{6}$$

$$R_d=0.001\ 5V_{cmax} \tag{7}$$

式中：A_n 为净光合速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，A_c、A_j 和 A_p 分别为 Rubisco 限制、RuBP 限制和 TPU 限制阶段的净 CO_2 同化速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，V_{cmax} 为最大羧化速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，J 为电子传递速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，TPU 为磷酸丙糖利用速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，R_d 为暗呼吸速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，f^*为 CO_2 补偿点(Pa)，A 为光合速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，K_c 和 K_o 分别为羧化作用和加氧作用的米氏常数(kPa 和 Pa)，C_c 和 o 分别为 Rubisco 中 CO_2 分压(Pa)和 O_2 分压(21 kPa)[16]，J_{max} 为最大电子传递速率(μmol·m^{-2}·s^{-1})，g_m 为叶肉导度(μmol·m^{-2}·s^{-1}·Pa^{-1})，C_i 为胞间 CO_2 浓度(Pa)，θ 为光响应曲线斜率(0.90)，a 为电子转移的量子产率(0.30)，Q 为光合作用量子通量密度(0.093 μmol·m^{-2}·s^{-1})[7]。

2.3 参数估计方法

贝叶斯定理认为，参数的后验分布与先验分布和概率密度函数的乘积成正比[17]，其表达式为:

$$p(\beta\mid D)=\frac{p(D\mid\beta)}{p(D)}\propto p(D\mid\beta)\times p(\beta) \tag{8}$$

式中：β 为由待估参数构成的参数向量(包括 V_{cmax}、J_{max}、TPU 和 g_m)，D 为观测数据，$p(\beta\mid D)$ 为后验分布，$p(D\mid\beta)$ 为抽样分布的概率密度函数，$p(\beta)$ 为待估参数 β 的先验概率分布，$p(D)$ 为随机变量的边缘分布。样本抽取采用 Markov Chain Monte Carlo MCMC)方法[18-20]。

最小二乘法在 FvCB 模型参数估计中应用较早，其基本思想是通过最小化误差的平方和寻找数据的最佳函数匹配[10]。假设有一组数据 x_i, y_i, i=1, 2, …, N，且已知该组数据满足 $\hat{y}(x)=f(a,x)$，a 为待定参数向量，则最小二乘法的目标是求出一组待定参数值，可以定义出最优化问题，如下:

$$J=\min_a\sum_{i=1}^{N}[y_i-\hat{y}(x_i)]^2=\min_a\sum_{i=1}^{N}[y_i-f(a,x_i)]^2 \tag{9}$$

3 结果与分析

3.1 光合作用参数估计结果

以无核白葡萄为研究对象，同时选用最小二乘法和贝叶斯方法对 FvCB 模型运用同一套观测数据集进行参数估计(图 1)。从图中可以看出：无论是贝叶斯方法还是最小二乘法，参数季节变化显著。对于参数 V_{cmax}、J_{max} 和 TPU，其值呈先增大后减小的趋势，8 月达到最大，9 月最小；而 g_m 则是 6 月和 9

月略大于 7 月和 8 月，且两种参数估计结果的季节变化规律一致。值得注意的是，传统的最小二乘法获得的参数估计结果是一个定值，而基于贝叶斯方法的估计结果不但可以获得参数估计结果的中值，还可以获得参数的分布范围。此外，从表 1 可以看出，最小二乘法估计出的参数 V_{cmax} 在 4 个月中均大于贝叶斯方法估计结果，最大差别可达 15.51 μmol·m^{-2}·s^{-1}(9 月)，而参数 J_{max}、TPU 和 g_m 无此现象。

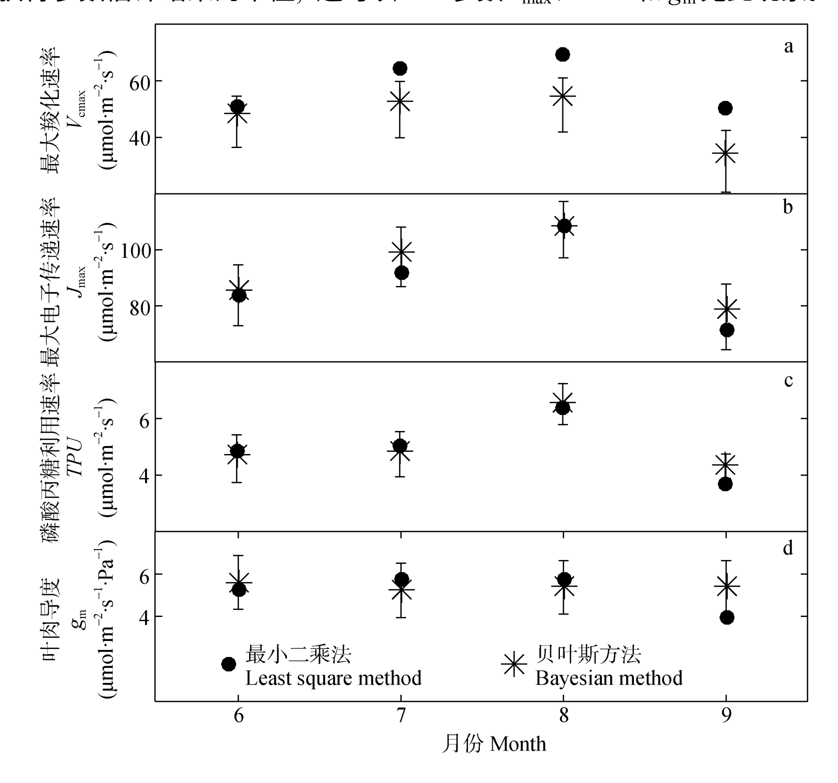


图 1　不同月份基于贝叶斯后验分布及最小二乘法的葡萄光合参数估计结果(I 代表贝叶斯后验分布范围)

Fig. 1　Posterior mean estimates results given by the Bayesian method and the least square method estimation results of grape photosynthetic parameters in different months (I represents posterior distribution ranges based the Bayesian method)

表 1　不同月份基于最小二乘法参数估计结果和基于贝叶斯方法的参数先验信息与估计结果

Table 1　Parameters estimation results based on the least square method and the prior information and estimation results based on the Bayesian method in different months for grape photosynthesis

参数 Parameter	最小二乘法 Least square method 月份 Month				贝叶斯方法 Bayesian method: 先验信息 Prior information			后验分布 Posterior distribution 月份 Month				后验中值 Posterior median 月份 Month			
	6	7	8	9	下限 Lower limit	上限 Upper limit	参考文献 Reference	6	7	8	9	6	7	8	9
V_{cmax} (mol·m^{-2}·s^{-1})	50.82	64.59	69.45	50.17	10	150	[7], [12],[13]	36.65~88.13	31.06~88.47	32.46~88.98	23.76~90.69	48.21	52.98	54.30	34.66
J_{max} (mol·m^{-2}·s^{-1})	64.06	71.67	88.65	51.19	20	150	[7], [12],[13]	55.57~123.93	57.41~122.39	63.89~123.98	47.26~121.92	65.51	69.36	88.45	58.86
TPU (mol·m^{-2}·s^{-1})	4.84	5.06	6.40	3.70	0	9	[7], [12]	3.30~8.45	3.69~8.48	4.28~8.61	3.14~5.69	4.71	4.86	6.56	4.38
g_m (μmol·m^{-2}·s^{-1}·P$_a$$^{-1}$)	5.26	5.73	5.73	3.95	1	10	[7], [12]	1.55~9.40	1.46~9.36	1.53~9.32	1.42~9.34	5.61	5.29	5.39	5.41
RMSE	0.58	1.39	1.12	0.75	—	—	—	—				1.06	0.70	1.26	0.76

V_{cmax}: 最大羧化速率; J_{max}: 最大电子传递速率; TPU: 磷酸丙糖利用速率; g_m: 叶肉导度; RMSE: 均方根误差。V_{cmax}: maximum rate of Rubisco activity; J_{max}: maximum electron transport rate; TPU: rate of triose-phosphates utilization; g_m: mesophyll conductance; RMSE: root mean square error.

与最小二乘法不同，贝叶斯方法是一种参数区间估计方法，其目标不是在参数可行区间内找到一个使模型模拟效果最好的最优参数组合，而是在充分考虑先验信息误差的前提下在一定的置信水平上估计模型参数的分布区间。从不同月份参数的先验信息及后验分布结果可以看出(表 1)：基于先验信息的贝叶斯参数估计方法可以有效地缩小给定的参数先验分布范围。定义 UR(uncertainty reductions)为参

数不确定性相对减小量($UR=1-CI_{posterior}/CI_{prior}$，其中 $CI_{posterior}$ 和 CI_{prior} 分别为后验分布和先验分布的95%置信区间)[21]，则对参数 V_{cmax}、J_{max} 和TPU，在不同月份其不确定性相对减小量近50%，最高达72%；而对于 g_m, UR值相对较小，仅略大于10%(表2)。由此可见，参数 V_{cmax}、J_{max} 和TPU收敛效果很好，在贝叶斯方法下可被很好地估计。

表2 95%置信区间下葡萄光合参数不同月份后验分布相较于先验分布的不确定性相对减小量

Table 2 Relative uncertainty reductions in the length of 95% credible interval form prior to posterior distribution of grape photosynthesis in different months %

月份 Month	V_{cmax}	J_{max}	TPU	g_m
6	63	47	43	13
7	59	50	47	12
8	60	54	52	13
9	52	43	72	12

V_{cmax}: 最大羧化速率; J_{max}: 最大电子传递速率; TPU: 磷酸丙糖利用速率; g_m: 叶肉导度; RMSE: 均方根误差。V_{cmax}: maximum rate of Rubisco activity; J_{max}: maximum electron transport rate; TPU: rate of triose-phosphates utilization; g_m: mesophyll conductance; RMSE: root mean square error.

3.2 基于观测值和模拟值的模型评价

在不同胞间 CO_2 浓度下，基于贝叶斯方法的净光合速率估计值(A_{nsim})和净光合速率观测值(A_{nobs})的线性回归如图2所示，可以看出：4个月的相关系数均较高，R^2 均在0.90以上；同时，各月观测/拟合趋势线趋近于1∶1直线，且在8月和9月更为显著(表3)。此外，与最小二乘法相比，贝叶斯方法所得观测/拟合数据点整体分布在更加靠近1∶1直线的区域，充分表明贝叶斯方法具有更强的收敛性，获得了更高精度的参数估计结果。

光合作用对胞间 CO_2 浓度的响应曲线(A/C_i 曲线)是分析光合作用机理的重要指标。将不同方法的参数估计结果应用于FvCB模型，A/C_i 曲线拟合结果如图3所示。从图中可以看出：对于贝叶斯方法的拟合结果，净光合速率(A_n)随胞间 CO_2 浓度(C_i)的升高呈现出明显的3个阶段，与FvCB模型结构相吻合，即：当 C_i 相对较低时，A_n 随 C_i 的升高呈直线快速上升，此时处于光合作用第1阶段——Rubisco限制阶段；随着 C_i 的变大，A_n 随 C_i 升高的增速逐渐变小，此时处于第2阶段——RuBP限制阶段；当 C_i 继续增大

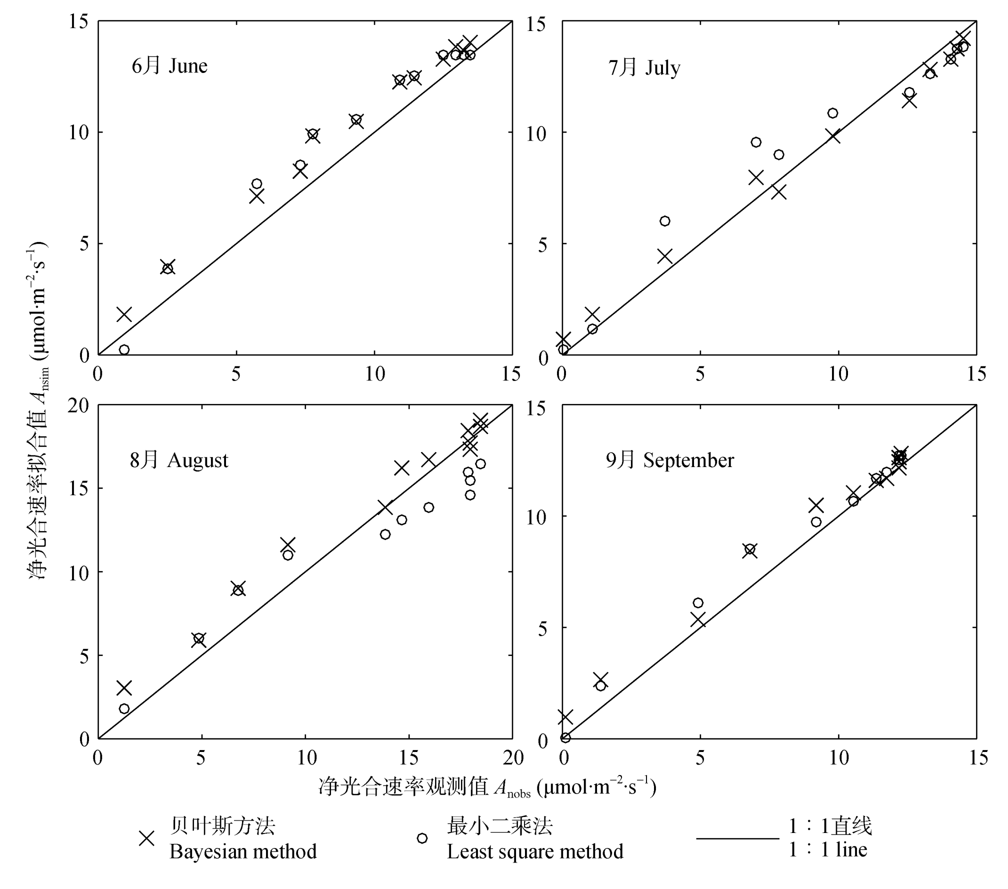


图2 不同月份葡萄净光合速率观测值和贝叶斯方法及最小二乘法拟合的线性回归

Fig. 2 Regressions of grape net photosynthesis rate between measured value (A_{nobs}) and modeled value (A_{nsim}) by the Bayesian method and the least square method in different months

表 3　基于贝叶斯方法的葡萄不同月份净光合速率观测值(A_{nobs})和拟合值(A_{nsim})的统计信息

Table 3　Statistical information of measured (A_{nobs}) and estimated (A_{nsim}) values of net photosynthesis rate of grape based on the Bayesian method in different months

月份 Month	回归方程 Regression equation	相关系数(R^2) Correlation coefficient	平均偏差 Mean bias	纳什系数(NSE) Nash coefficient	归一化平均绝对误差(NMAE) Normalized mean absolute error
6	A_{nsim}=0.83A_{nobs}+0.79	0.99	1.04	0.95	0.12
7	A_{nsim}=0.89A_{nobs}+0.90	0.99	0.65	0.98	0.07
8	A_{nsim}=0.92A_{nobs}+0.86	0.99	1.00	0.96	0.08
9	A_{nsim}=0.92A_{nobs}+1.26	0.99	0.59	0.97	0.07

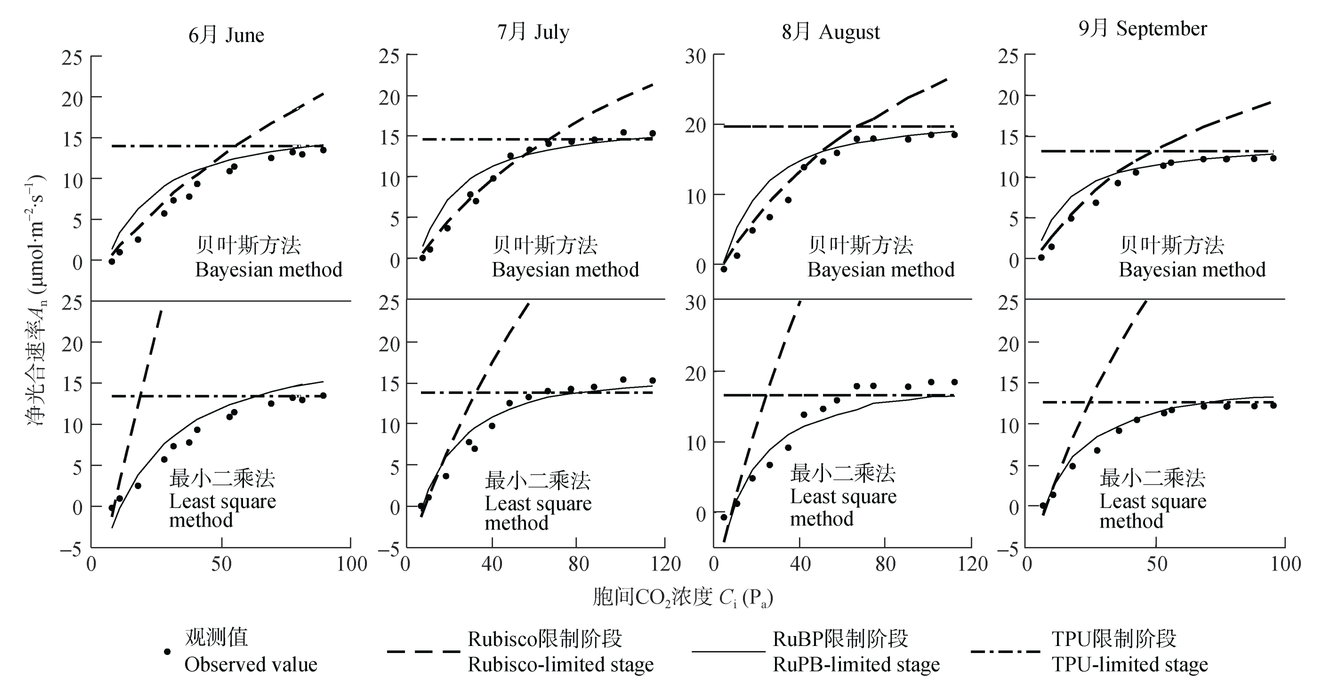


图 3　不同月份葡萄净光合速率随细胞间二氧化碳浓度(C_i)变化趋势图

Fig. 3　Prediction of net photosynthesis rate (A_n) of grape as a function of intercellular carbon dioxide concentration (C_i) in different months

到一定数值时, A_n 不再随 C_i 的升高而变大, 而是趋于稳定, 此时处于第 3 阶段——TPU 限制阶段。且 4 个月第 1 阶段和第 2 阶段转折点对应的 C_i 分别为 31.68 Pa、48.19 Pa、50.82 Pa 和 35.67 Pa, 出现了明显的季节差异性。此外, 不同月份最大净光合速率分别为: 13.49 μmol·m^{-2}·s^{-1}、15.32 μmol·m^{-2}·s^{-1}、18.49 μmol·m^{-2}·s^{-1}、12.28 μmol·m^{-2}·s^{-1}, 与参数估计结果有相同的季节变化规律。而对于最小二乘法的拟合结果, 尽管确保了均方根误差保持在较小的范围, 由于估计时参数之间的相互作用, 只拟合出了二磷酸核酮糖再生限制阶段(RuBP 限制)和磷酸丙糖利用限制阶段(TPU 限制), 导致了生理生态学意义不够明显。可见, 相较于最小二乘法, 贝叶斯方法可以估计出具有生化意义的模型参数, 参数优化后的 FvCB 模型可用于模拟我国西北干旱绿洲作物的光合速率。

4　讨论

无核白葡萄为多年生木本, 参数 V_{cmax}、J_{max} 和 TPU 的估计范围与 Wullschleger[9]结果相似, Wullschleger 选取了 109 种 C_3 植物, 基于 A/C_i 曲线的非线性回归技术估计了不同植被类型的参数值, 给出参数变化范围: V_{cmax} 为 6~94 μmol·m^{-2}·s^{-1}, J_{max} 为 17~372 μmol·m^{-2}·s^{-1}, TPU 为 4.9~20.1 μmol·m^{-2}·s^{-1}, 其中一年生草本植物参数值大于多年生木本植物。本文利用贝叶斯方法精准地估计了模型参数, 且结果在前人所给结果范围内。同时, 传统参数估计方法: 如 Harley 等[8]利用分段方法估计出了 V_{cmax}、R_d 和 g_m, 但该方法将 A/C_i 曲线中 Rubisico 限制阶段和 RuBP 限制阶段的转折点设为定值, 而本文贝叶斯拟合结果显示出转折点明显的季节差异性, 反映出分段估计法受人为分割的扰动会产生较大误差; Sharkey 等[7]用微软电子表格同时估计出 V_{cmax}、J_{max}、TPU、R_d 和 g_m; Dubois 等[10]和 Miao 等[11]结合了格点搜索和非线性最小二乘法估计出 V_{cmax}、J_{max}、TPU 和 R_d, 这些方法都是派生的最优化方法, 不但计算

量较大、对初始值的设定十分敏感，而且适用于连续函数的参数估计，而对于分段不连续的 FvCB 模型难以得出全局最优结果。相反，贝叶斯方法不需要通过求导函数实现目标函数的最小化，同时又结合了先验信息，所以该方法在解决高维复杂不连续函数的参数估计问题上有很大优越性。本文首次将该方法应用在我国西部极端干旱的敦煌绿洲，准确估计了当地主要经济作物葡萄在典型生长季(6 月、7 月、8 月和 9 月)内不同阶段(开花期、坐果期、浆果生长期、浆果成熟期)的模型参数，对提高农田生态系统的产量有一定指导，为陆地生态系统碳循环模型研究提供一定的借鉴。

不同月份参数估计结果表现出明显的季节差异，与葡萄在不同季节氮分配策略相关。无核白葡萄为 C_3 植物，约 60%~80%的叶片氮以核酸和酶的形式存在于叶片中[22-23]。前人研究表明，叶片含氮量与光合作用能力存在正相关关系[24-25]。在光合能力较强的月份，所需氮素多，酶活性强；反之，光合能力较弱的月份，氮素消耗较少，酶活性较弱[26-27]。V_{cmax} 是Rubisco 限制阶段的最重要参数，此时 CO_2 的固定受 Rubisco 活性的制约，所以在 8 月，参数 V_{cmax} 也处于最大值；而在以 9 月份为代表的浆果成熟期，叶片趋于衰老，酶活性较弱，在无大量氮素消耗时，叶片氮向木质部转移贮存，参数 V_{cmax} 也出现较低值。同理，分别作用于 RuBP 限制阶段和 TPU 限制阶段的参数 J_{max} 和 TPU 也表现出相同的季节变化特性。而参数 g_m 则受温度和太阳辐射影响较大，7 月和 8 月相较于 6 月和 9 月具有较高的温度和较强的太阳辐射，此时叶片为防止大量蒸发失水，会出现气孔关闭情况，从而导致较小的气孔导度。

5 结论

1)基于贝叶斯方法估计出 FvCB 模型中 4 个主要参数范围：最大羧化速率(V_{cmax})为 23.76~90.69 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$，最大电子传递速率($J_{max}$)为 47.26~123.98 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$，磷酸丙糖利用速率(TPU)为 3.14~8.61 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$，叶肉导度($g_m$)为 1.42~9.40 $\mu mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1}$。

2)参数大小存在明显的季节变化规律，最大羧化速率(V_{cmax})、最大电子传递速率(J_{max})和磷酸丙糖利用速率(TPU)参数大小出现先增后减的趋势，8 月最大 9 月最小，气孔导度(g_m)则 6 月和 9 月略大于 7 月和 8 月。

3)与传统的最小二乘法相比，贝叶斯参数估计能够有效解决高维度复杂不连续模型的参数估计问题，可以基于观测数据有效估计出具有生化意义的合理参数值。

参考文献 References

[1] Hansen J, Kharecha P, Sato M. Climate forcing growth rates: Doubling down on our Faustian bargain[J]. Environmental Research Letters, 2013, 8(1): 011006

[2] Yvon-Durocher G, Allen A P, Bastviken D, et al. Methane fluxes show consistent temperature dependence across microbial to ecosystem scales[J]. Nature, 2013, 507(7493): 488–491

[3] von Caemmerer S, Farquhar G D. Some relationships between the biochemistry of photosynthesis and the gas exchange of leaves[J]. Planta, 1981, 153(4): 376–387

[4] Harley P C, Sharkey T D. An improved model of C_3 photosynthesis at high CO_2: Reversed O_2 sensitivity explained by lack of glycerate reentry into the chloroplast[J]. Photosynthesis Research, 1991, 27(3): 169–178

[5] Bernacchi C J, Singsaas E L, Pimentel C, et al. Improved temperature response functions for models of Rubisco-limited photosynthesis[J]. Plant, Cell & Environment, 2001, 24(2): 253–259

[6] Long S P, Bernacchi C J. Gas exchange measurements, what can they tell us about the underlying limitations to photosynthesis? Procedures and sources of error[J]. Journal of Experimental Botany, 2003, 54(392): 2393–2401

[7] Sharkey T D, Bernacchi A J, Farquhar G D, et al. Fitting photosynthetic carbon dioxide response curves for C_3 leaves[J]. Plant, Cell & Environment, 2007, 30(9): 1035–1040

[8] Harley P C, Thomas R B, Reynolds J F, et al. Modelling photosynthesis of cotton grown in elevated CO_2[J]. Plant, Cell & Environment, 1992, 15(3): 271–282

[9] Wullschleger S D. Biochemical limitations to carbon assimilation in C_3 plants — A retrospective analysis of the A/C_i curves from 109 species[J]. Journal of Experimental Botany, 1993, 44(5): 907–920

[10] Dubois J J B, Fiscus E L, Booker F L, et al. Optimizing the statistical estimation of the parameters of the Farquhar-von Caemmerer-Berry model of photosynthesis[J]. New Phytologist, 2007, 176(2): 402–414

[11] Miao Z W, Xu M, Lathrop J R, et al. Comparison of the A-Cc curve fitting methods in determining maximum ribulose 1.5-bisphosphate carboxylase/oxygenase carboxylation rate, potential light saturated electron transport rate and leaf dark respiration[J]. Plant, Cell & Environment, 2009, 32(2): 109–122

[12] Su Y H, Zhu G F, Miao Z W, et al. Estimation of parameters of a biochemically based model of photosynthesis using a genetic algorithm[J]. Plant, Cell & Environment, 2009, 32(12): 1710–1723

[13] Zhu G F, Li X, Su Y H, et al. Seasonal fluctuations and temperature dependence in photosynthetic parameters and stomatal conductance at the leaf scale of *Populus euphratica* Oliv[J]. Tree Physiology, 2010, 31(2): 178–195

[14] Feng X H, Dietze M. Scale dependence in the effects of leaf

ecophysiological traits on photosynthesis: Bayesian parameterization of photosynthesis models[J]. New Phytologist, 2013, 200(4): 1132–1144

[15] 白岩, 朱高峰, 张琨, 等. 基于树干液流及涡动相关技术的葡萄冠层蒸腾及蒸散发特征研究[J]. 生态学报, 2015, 35(23): 7821–7831
Bai Y, Zhu G F, Zhang K, et al. Research of transpiration and evapotranspiration from a grapevine canopy combining the sap flow and eddy covariance techniques[J]. Acta Ecologica Sinica, 2015, 35(23): 7821–7831

[16] Ethier G J, Livingston N J. On the need to incorporate sensitivity to CO_2 transfer conductance into the Farquhar-von Caemmerer-berry leaf photosynthesis model[J]. Plant, Cell & Environment, 2004, 27(2): 137–153

[17] Bayes T. An essay towards solving a problem in the doctrine of chances, by the late Rev. Mr. Bayes, F.R.S. Communicated by Mr. Price, in a letter to John Canton, A. M and F. R. S[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 1763, 53: 370–418

[18] Metropolis N R, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, et al. Equation of state calculations by fast computing machines[J]. Journal of Chemical Physics, 1953, 21(6): 1087–1091

[19] Hastings W K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications[J]. Biometrika, 1970, 57(1): 97–109

[20] Liu J S, Liang F M, Wong W H. The multiple-try method and local optimization in metropolis sampling[J]. Journal of the American Statistical Association, 2000, 449(95): 121–134

[21] Zhu G F, Li X, Su Y H, et al. Simultaneously assimilating multivariate data sets into the two-source evapotranspiration model by Bayesian approach: Application to spring maize in an arid region of northwestern China[J]. Geoscientific Model Development, 2014, 7(4): 1467–1482

[22] Evans J R, Seemann J R. Differences between wheat genotypes in specific activity of ribulose-1, 5-bisphosphate carboxylase and the relationship to photosynthesis[J]. Plant Physiology, 1984, 74(4): 759–765

[23] 刘涛, 鲁剑巍, 任涛, 等. 不同氮水平下冬油菜光合氮利用效率与光合器官氮分配的关系[J]. 植物营养与肥料学报, 2016, 22(2): 518–524
Liu T, Lu J W, Ren T, et al. Relationship between photosynthetic nitrogen use efficiency and nitrogen allocation in photosynthetic apparatus of winter oilseed rape under different nitrogen levels[J]. Journal of Plant Nutrition and Fertilizer, 2016, 22(2): 518–524

[24] Regina I S, Leonardi S, Rapp M. Foliar nutrient dynamics and nutrient-use efficiency in *Castanea sativa* coppice stands of southern Europe[J]. Forestry, 2001, 74(1): 1–10

[25] Wright I J, Reich P B, Westoby M. Least-cost input mixtures of water and nitrogen for photosynthesis[J]. The American Naturalist, 2003, 161(1): 98–111

[26] Adams M A, Turnbull T L, Sprent J I, et al. Legumes are different: Leaf nitrogen, photosynthesis, and water use efficiency[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2016, 113(15): 4098–4103

[27] 赵丽敏, 李秧秧, 左力翔. 土壤渐进干旱过程中玉米、高粱茎水分传输能力与光合作用的协调性研究[J]. 中国生态农业学报, 2013, 21(7): 817–823
Zhao L M, Li Y Y, Zuo L X. Coordination between stem water transport capacity and photosynthesis in corn and sorghum cultivars during progressive soil drying[J]. Chinese Journal of Eco-Agriculture, 2013, 21(7): 817–823